



TITLE:

微細孔隙内流体の拡散挙動及び NMR緩和時間の解明

AUTHOR(S):

澤, 侑乃輔

CITATION:

澤, 侑乃輔. 微細孔隙内流体の拡散挙動及びNMR緩和時間の解明. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2015, 2014: 75-77

ISSUE DATE:

2015-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/197622>

RIGHT:

微細孔隙内流体の拡散挙動及び NMR 緩和時間の解明

Investigation of Diffusion and NMR Relaxation Behavior in nano pores

工学研究科 都市社会工学専攻 環境資源システム工学分野 澤 侑乃輔

背景と目的

プロトン核磁気共鳴法(NMR)は、対象内部の性状を非破壊で知ることができる手法として、医療分野をはじめ、広く工学的に利用されている。石油工学分野においては、NMR は短時間かつ非破壊で地層中の水素原子を定量できるとして、浸透率や孔隙率の算出に用いられている。しかしながらこれらの計測には多くの経験式が利用されており、その理論的根拠は明確ではない。その理由は、NMR は水素原子核を対象とした磁化の乱れを観測し、横緩和時間を計測するところ、該緩和時間と岩石性状との関係が正しく解明されていないことによる。地層中の水素原子核の磁化の乱れは、地層内での分子運動の乱れと密接に関連している。本研究では、石油貯留層を対象としたパイロフィライト層を分子動力学法により再現し、層間中の水分子の分子運動を解析することで緩和時間を推定することを目的としている。

検討内容

分子動力学法による結晶の構築には、結晶構造の位置情報が必要となる。これには通常、X 線構造解析で得られた、結晶を構成する個々の原子の位置情報を用いている。しかしながら、水素原子核については 1s 軌道にしか電子を有しておらず、照射 X 線と電子との散乱が少ないため正確な位置情報が知りえない。中性子線を用いた構造解析では水素原子核の位置決定が行えるが、X 線結晶解析とは測定原理が全く異なる。これらを踏まえ、本研究では、まず X 線構造解析で得られた結果を基に結晶部分の構造を決定した。次に水素原子の配置については、計算に用いる分子道力場に合致するよう、マテリアルスタジオを用いて原子同士の結合長さと結合角を調整しながら水素原子核の初期位置を決定した。

結果

下図はこれらによって得られたパイロフィライト層である。

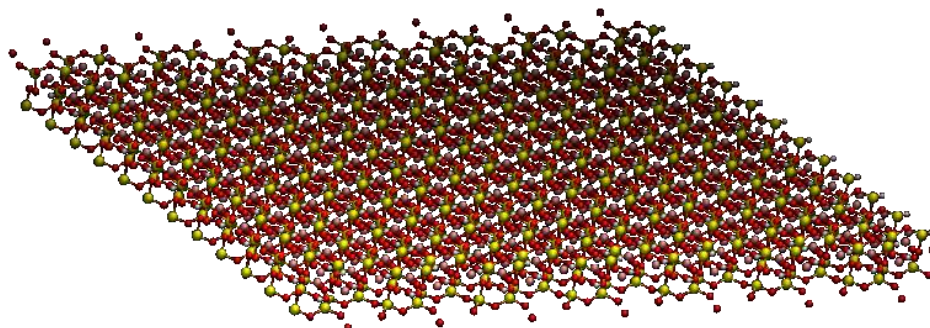


図 1. パイロフィライト層

図1で得られたパイロフィライト層を用いて水分子を挟み込み、仮想的に孔隙を再現したものが図2である。

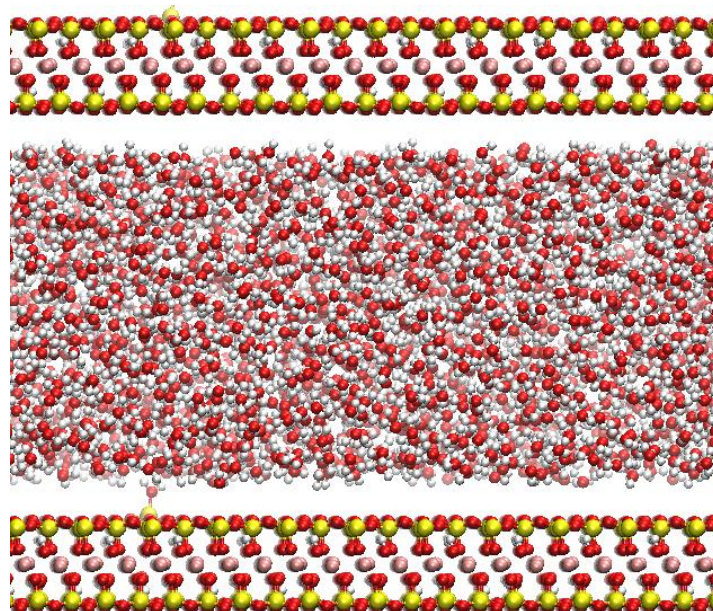


図2. パイロフィライト層による層間水の再現

層間に任意の個数の水分子を挿入し、NPT 計算(分子数、圧力、温度一定)を適宜行うことで孔隙の大きさを調整した。該系が平衡状態に至った後の全原子の水分子の軌跡を解析することで、NMRにおいて観測される T_2 緩和時間を計算することに成功した。得られた T_2 緩和時間は水がバルクで存在するよりも短い値であり、これは量子論的に述べると、水素核の状態間の遷移が高確率で発生したことを示唆するものであった。また分子論の観点から述べると、孔隙に挟まれることにより拡散性が低下し、水素核同士が相互作用しあう時間が長くなることで状態遷移確率が上昇したと考えられるものであった。本研究によってこれら理想的な環境下における水素核の状態間の遷移確率によって緩和が起こる速度が定式化できた。緩和速度は実験的には求めることができない値であり、これら緩和速度を孔隙内流体の性質と併せて求めることができた点、工学的に意義深いと考えられる。

参考論文

- [1] H. L. Jung, G. Stephen, Single crystal S-ray refinement of pyrophyllite-1 *Tc*, Am. Mineral. **66**, 350-357 (1981).
- [2] N. Bloembergen, E.M. Purcell, R.V. Pound, Relaxation Effects in Nuclear Magnetic Resonance Adsorption, Phys. Rev. **73**, 679-746 (1948).